

Mini-projet : simulation d'écoulements de fluides non newtoniens

proposé par Claude Le Bris

Le but de ce mini-projet est la simulation numérique de l'écoulement monodimensionnel d'un fluide non newtonien.

Première partie : le modèle de Oldroyd B

On considère les équations suivantes

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial \tau}{\partial y}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \tau}{\partial t} + \lambda \tau = \frac{\partial u}{\partial y}. \quad (2)$$

Dans ces équations, u est la vitesse du fluide selon l'axe $0x$ (voir la Figure) et est supposée être une fonction du temps t et de la variable $y \in [0, L]$ seulement (pas de x) : $u = u(t, y)$. La fonction τ , homogène à une contrainte, est, elle aussi supposée ne dépendre que de t et de y . La constante $\nu > 0$ est la viscosité du fluide, et la constante λ est un paramètre réel strictement positif fixé. On complémente l'équation (1) des conditions aux limites

$$u(t, y = 0) = V, \quad u(t, y = L) = 0, \quad \text{pour tout temps } t > 0, \quad (3)$$

où $V > 0$ est une constante, et les deux équations de conditions initiales $u(t = 0) = u_0$, fonction appartenant à $H^1(0, L)$ et $\tau(t = 0) = \tau_0$, fonction appartenant à $L^2(0, L)$.

1.1) Montrer que, sous une bonne hypothèse sur la condition initiale, ces équations s'obtiennent à partir des équations suivantes, posées sur la vitesse \vec{v} et le tenseur des contraintes σ

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} - \nu \Delta \vec{v} + \nabla p = \frac{1}{\lambda} \operatorname{div} \sigma, \\ \operatorname{div} \vec{v} = 0 \end{cases} \quad (4)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \sigma - \sigma^t \nabla \vec{v} - \nabla \vec{v} \sigma + \lambda \sigma = \lambda (\nabla \vec{v} + {}^t \nabla \vec{v}) \quad (5)$$

lorsque l'on suppose que $\vec{v} = u(t, y) \vec{e}_x$ (où \vec{e}_x est le vecteur unitaire selon l'axe des x), que la pression p et la matrice tenseur des contraintes σ ne dépendent pas de x non plus, et que l'on note $\tau(t, y) = \frac{1}{\lambda} \sigma_{12}$.

Pour résoudre les équations (1)-(2), on utilise les équations dites semi-discrétisées en temps suivantes

$$\frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t} - \nu (u_{n+1})'' = (\tau_n)', \quad (6)$$

$$\frac{\tau_{n+1} - \tau_n}{\Delta t} + \lambda \tau_{n+1} = (u_{n+1})', \quad (7)$$

où la notation v' et v'' désigne la dérivation par rapport à la variable y , et où u_n et τ_n sont bien sûr les approximations au temps $t_n = n\Delta t$ des fonctions $u(t_n, y)$, $\tau(t_n, y)$.

On adopte une discrétisation par éléments finis monodimensionnels $P1$ pour u_n et $P0$ pour τ_n , sur le même maillage homogène de pas Δy sur $[0, L]$.

1.2) Justifier (sans calcul) cette différence de degré d'approximation entre u et τ .

On choisit pour le moment $V = 0$ comme condition au bord en $y = 0$.

1.3) Montrer formellement sur le système (1)-(2) que

$$\int_0^L |u|^2 + \int_0^L |\tau|^2 \quad (8)$$

est une fonction bornée (et en fait décroissante) du temps.

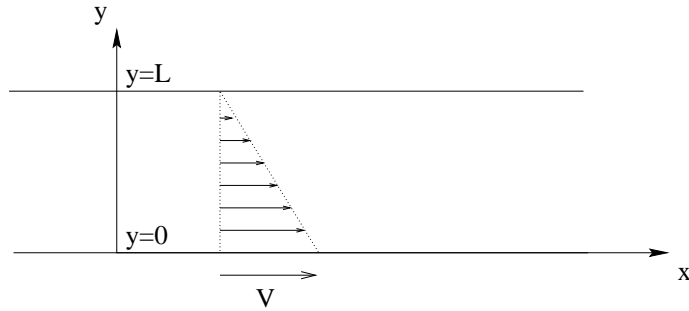


FIG. 1 – Ecoulement de type “plan de Couette”.

1.4) Montrer que, sous une condition sur le pas de temps Δt que l’on explicitera, on a la condition dite de stabilité

$$\int_0^L (u_n)^2 + \int_0^L (\tau_n)^2 \leq C \quad (9)$$

où C est une constante indépendante du temps, que l’on explicitera aussi. Montrer que dans ce cas où $V = 0$ on a même la décroissance de la quantité au membre de gauche de (9).

1.5) Réalisez la formulation variationnelle discrète des équations (6) et (7). On justifiera en particulier le fait qu’il n’y a pas besoin de condition au bord sur τ .

1.6) Programmer cette résolution en Scilab. On pourra prendre comme donnée initiale $u(y) = 1 - y$ et $\tau(y)$ constant. Qu’arrive-t-il au bout d’un temps assez long? Justifier ce comportement.

1.8) Reprendre l’étude de stabilité de la question 1.4 quand $V > 0$. De quoi dépend alors la constante C de (9)? On pourra par exemple effectuer un changement de fonctions inconnues.

1.9) On considère désormais le schéma semi-discrétisé qui couple (6) et

$$\frac{\tau_{n+1} - \tau_n}{\Delta t} + \lambda \tau_{n+1} = (u_n)', \quad (10)$$

Dans le cas $V = 0$, parvenez-vous à établir une condition sur le pas de temps pour laquelle (9) est vraie pour le système (6)-(10)?

1.10) Réalisez la formulation variationnelle discrète de (6)-(10) et programmer en Scilab sa résolution. Commenter la comparaison des deux méthodes (6)-(7) et (6)-(10) du point de vue de la stabilité, i.e. que se passe-t-il quand le pas de temps est pris “grand” dans l’une et l’autre des méthodes?

Deuxième partie : la microstructure du fluide

Un fluide comme celui décrit par les équations (1)-(2) est souvent dit un fluide à *mémoire*, parce que le tenseur des contraintes dépend de toute l’histoire de la déformation du fluide.

2.1) Justifier (sans calcul) cette appellation au vu de l’équation (2).

Très souvent, ce phénomène de mémoire est dû au fait que, vu à l’échelle microscopique, le fluide est le mélange d’un solvant (l’eau) et de microstructures qui flottent dans ce solvant (par exemple des brins d’ADN, ou des chaînes de polymères, ou des petits cristaux, etc, etc). Nous allons montrer maintenant que l’équation (2) peut être effectivement obtenue comme la description macroscopique du flottement de ces microstructures. Pour simplifier, nous considérons que la microstructure est un petit bâton de taille microscopique, qui peut à la fois s’allonger/rétrécir et s’orienter dans n’importe quelle direction dans le fluide. En d’autres termes, il s’agit en chaque point y d’un vecteur $\vec{R} = (P, Q)$, chacune de ses coordonnées dépendant du temps.

Fixons un tel point $y \in [0, L]$, et supposons connaître la fonction $\frac{\partial u}{\partial y}$ en ce point y au cours du temps.

Pour décrire la dynamique de \vec{R} , on considère la fonction ψ solution de l'équation aux dérivées partielles (de convection-diffusion) suivante sur l'espace \mathbf{R}^2 des couples (P, Q) .

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, P, Q) &= -\frac{\partial}{\partial P} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial y}(y, t) Q - P \right) \psi(t, P, Q) \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial Q} (Q \psi(t, P, Q)) + \left(\frac{\partial^2}{\partial P^2} + \frac{\partial^2}{\partial Q^2} \right) \psi(t, P, Q) \end{aligned} \quad (11)$$

Cette fonction $\psi(t, P, Q)$ définit la probabilité pour que, à l'instant t , le vecteur \vec{R} ait les coordonnées (P, Q) . On part à l'instant $t = 0$ d'une fonction $\psi_0 \geq 0$, telle que $\int_{\mathbf{R}^2} \psi_0 = 1$.

2.2) Montrer par un calcul formel (mais que l'on peut justifier mathématiquement) que l'équation (11) entraîne $\int_{\mathbf{R}^2} \psi = 1$ pour tout temps.

2.3) Montrer que si l'on pose

$$\tau = \int_{\mathbf{R}^2} PQ \psi \, dP \, dQ, \quad (12)$$

et si l'on part d'une fonction ψ_0 qui vérifie $\int_{\mathbf{R}^2} Q^2 \psi_0 = 1$ et $\int_{\mathbf{R}^2} PQ \psi_0 = \tau_0$, alors τ est exactement la solution de (2) pour un certain λ qu'on identifiera.

On veut maintenant programmer la résolution de (11). Pour cela, on introduit la fonction

$$\psi_\infty = c_\infty \exp(-(P^2 + Q^2)/2), \quad (13)$$

où c_∞ est une constante qu'on calculera telle que $\int_{\mathbf{R}^2} \psi_\infty = 1$. On introduit alors la fonction

$$\varphi = \frac{\psi}{\psi_\infty}. \quad (14)$$

2.4) Ecrire l'équation vérifiée par φ .

On choisit comme approximation semi-discrétisée en temps de cette équation l'équation

$$\begin{aligned} \psi_\infty \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{\Delta t} &= -\frac{\partial}{\partial P} \left(\frac{\partial u}{\partial y} Q \psi_\infty \varphi_n \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial P} \left(\psi_\infty \frac{\partial}{\partial P} \varphi_{n+1} \right) + \frac{\partial}{\partial Q} \left(\psi_\infty \frac{\partial}{\partial Q} \varphi_{n+1} \right) \end{aligned} \quad (15)$$

Pour discrétiser φ_n , on ne choisit pas une base d'éléments finis.

2.5) Expliquer pourquoi en effet il n'est pas facile d'utiliser la méthode des éléments finis pour des résolutions d'équations sur l'espace \mathbf{R}^2 tout entier.

On procède donc exactement comme dans la méthode des éléments finis, à cette nuance près que les fonctions de base que l'on va choisir ne sont pas des fonctions polynômiales par morceaux mais sont de la forme suivante

$$\chi_{i,j}(P, Q) = H_i(P) H_j(Q), \quad (16)$$

où les fonctions H_i sont des polynômes de Hermite (définis sur tout l'espace et pas seulement sur des "mailles"). On ne prendra que les 3 premiers d'entre eux, c'est-à-dire

$$H_0(P) = 1, \quad H_1(P) = P, \quad H_2(P) = \frac{1}{\sqrt{2}}(P^2 - 1). \quad (17)$$

ce qui revient à ne prendre donc que 9 fonctions de base $\chi_{i,j}$. Les polynômes de Hermite vérifiant

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbf{R}} H_i(P) H_j(P) \exp(-P^2/2) dP = \delta_{ij}, \quad (18)$$

ils sont particulièrement bien adaptés au problème.

2.6) Réaliser la formulation variationnelle de (15) dans la base des χ_{ij} .

2.7) Programmer la résolution en Scilab. On prendra comme donnée initiale la fonction $\varphi_0 \equiv 1$, correspondant à $\psi_0 = \psi_\infty$, et on choisira diverses fonctions $\frac{\partial u}{\partial y}$, à commencer par zéro.

Remarque : On calculera les intégrales

$$\int_{\mathbf{R}} \frac{d^m H_i}{dP^m}(P) \frac{d^n H_j}{dP^n}(P) P^\alpha \exp(-P^2/2) dP, \quad (19)$$

pour i, j dans $\{0, 1, 2\}$, $\alpha \in \{0, 1\}$, et les ordres de dérivation m, n dans $\{0, 1\}$.